

МАГНІТНІ І ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ СПІН-1/2 ДИСТОРСНОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ІЗІНГА-ГАББАРДА

Лісний Б.М.

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів,
e-mail: lisnyj@icmp.lviv.ua

Розглядається спін-1/2 дисторсний ромбічний ланцюжок Ізінга-Габбарда у зовнішньому магнітному полі. Примітивна комірка ланцюжка визначається вузлами k і $k + 1$ і містить дві міжвузлові позиції $(k, 1)$ і $(k, 2)$, які разом з вузлами утворюють ромб. У вузлових позиціях примітивної комірки знаходяться ізінгівські спіни, які взаємодіють з сусідами ізінгівськими взаємодіями. Дві міжвузлові позиції в примітивній комірці займають мобільні електрони, по одному електрону на позицію. Мобільні електрони можуть здійснювати квантові перескоки тільки по міжвузлових позиціях у межах комірки. Процес перескоків регулюється правилом Паулі, згідно з яким перескок електронів у комірці можливий, коли їх спіни протилежні. Між двома електронами на одній позиції діє кулонівське відштовхування. Ізінгівські взаємодії вузлових спінів з міжвузловими електронами реалізуються на зв'язках вздовж сторін ромба і мають певну асиметрію відносно ромбічної симетрії. Асиметрія ізінгівських взаємодій полягає у тому, що їх величина на однонаправлених зв'язках однакова, а на різнонаправлених зв'язках різна. Гамільтоніан ланцюжка \mathcal{H} представляється у вигляді суми гамільтоніанів примітивних комірок \mathcal{H}_k . Гамільтоніан комірки \mathcal{H}_k складається з габбардівського гамільтоніана двох електронів, ізінгівської взаємодії електронів з вузловими спінами і енергії спінів комірки у зовнішньому магнітному полі:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_k = & \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} t(c_{k,1;\sigma}^\dagger c_{k,2;\sigma} + c_{k,2;\sigma}^\dagger c_{k,1;\sigma}) + \sum_{i=1}^2 U n_{k,i;\uparrow} n_{k,i;\downarrow} + \\ & + \mu_k (I_1 S_{k,1} + I_2 S_{k,2}) + \mu_{k+1} (I_2 S_{k,1} + I_1 S_{k,2}) - \\ & - \frac{1}{2} h_a (\mu_k + \mu_{k+1}) - h_b (S_{k,1} + S_{k,2}),\end{aligned}$$

де $c_{k,i;\sigma}^\dagger$ і $c_{k,i;\sigma}$ — оператори народження і знищення електрона зі спіном $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ в міжвузловій позиції (k, i) , $i = 1, 2$, примітивної комірки k ; $n_{k,i;\sigma} = c_{k,i;\sigma}^\dagger c_{k,i;\sigma}$ — оператор числа електронів зі спіном σ в позиції (k, i) ; $S_{k,i} = (n_{k,i;\uparrow} - n_{k,i;\downarrow})/2$ — z -компонента сумарного спіна електронів в позиції (k, i) .

Змінна μ_k позначає z -компоненту спін-1/2 оператора і описує стан ізінгівського спіна на вузлі k . Параметри t і U позначають інтеграл перескоку і однопозиційне кулонівське відштовхування, відповідно. Параметри I_1 і I_2 описують ізінгівську взаємодію вузлових спінів з мобільними електронами вздовж різнонаправлених зв'язків. Параметри h_a і h_b описують дію магнітного поля на ізінгівські спіни і спіни мобільних електронів, відповідно. Така модель без врахування однопозиційного кулонівського відштовхування електронів була запропонована в роботі M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, and M.L. Lyra,

Phys. Rev. B **77**, 024402 (2008) для вивчення ефектів геометричної фрустрації і проміжних плато намагнічення. Основна увага нашого дослідження зосереджена на вивченні впливу кулонівського відштовхування на основний стан і термодинаміку.

Для даного ланцюжка методом декораційно-ітераційного перетворення точно розраховано термодинамічні характеристики: вільну енергію, ентропію, теплоємність, намагніченість ізінгівської і габбардівської підсистем, магнітну сприйнятливість. При числовому аналізі розглянуто випадок антиферромагнітної взаємодії Ізінга ($I_1, I_2 > 0$), коли система геометрично фрустрована. Прийнято $h = h_a = h_b$ і $I_1 \geq I_2$, $\Delta I = I_1 - I_2$. Зроблено перехід до безрозмірних параметрів:

$$\tilde{h} = h / I_1, \quad \tilde{\Delta I} = \Delta I / I_1, \quad \tilde{\Delta I} \in [0, 1], \quad \tilde{t} = t / I_1, \quad \tilde{U} = U / I_1.$$

У даній системі реалізуються такі самі чотири основні стани: насичений парамагнітний стан SPA, феримагнітний стан FRI, ненасичений парамагнітний стан UPA і вузловий антиферромагнітний стан NAF, і вони утворюють такі самі три структурні типи фазової діаграми основного стану в площині $(\tilde{\Delta I}, \tilde{h})$ як це має місце у випадку неврахування кулонівського відштовхування (M.S.S. Pereira, et al., Phys. Rev. B **77**, 024402 (2008)). Вплив кулонівського відштовхування на фазову діаграму основного стану зручно досліджувати при зміні відштовхування разом зі зміною інтенсивності перескоків у режимі

$$\sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} - \tilde{U} = \text{const},$$

який залишає незмінною енергію стану UPA. У цьому режимі змінюється енергія лише одного з чотирьох основних станів, а саме енергія стану NAF. Вплив відштовхування у цьому режимі послаблюється зміною інтенсивності перескоків і на фазовій діаграмі основного стану проявляється тільки некомпенсований ефект впливу. Показано, що у цьому режимі структура фазової діаграми основного стану не змінюється, а некомпенсований ефект від зростання відштовхування полягає в зміщенні граничних ліній області основного стану NAF. Побудовано (\tilde{t}, \tilde{U}) -діаграму, яка відображає вплив відштовхування \tilde{U} і перескоків \tilde{t} на фазову діаграму основного стану $(\tilde{\Delta I}, \tilde{h})$. Таким чином отримано повний опис властивостей основного стану в залежності від чотирьох параметрів моделі. З'ясовано, що зростання відштовхування змінює фазову діаграму аналогічно як спадання інтенсивності перескоків. Отже, відштовхування послаблює зумовлені перескоками антиферромагнітні кореляції між мобільними електронами.

Вплив кулонівського відштовхування на намагніченість в залежності від поля і температури, магнітну сприйнятливість і теплоємність в залежності від температури досліджено в рамках описаного вище режиму послаблення цього впливу. У процесі намагнічення при нулі температури вплив відштовхування проявляється поблизу границі основного стану NAF. Він полягає у перебудові проміжних плато намагніченості внаслідок зміщення границі основного стану NAF. Згідно до цих змін перебудовуються криві намагнічення при низьких температурах. Також поблизу границі основного стану NAF внаслідок її зміщення під впливом відштовхування зазнають змін низькотемпературні криві намагніченості та магнітної сприйнятливості.

Зростання кулонівського відштовхування зміщує високотемпературні криві намагніченості підсистем: електронної підсистеми у бік збільшення намагніченості, а іонівської підсистеми у бік зменшення намагніченості. Внаслідок цього, високотемпературна крива сумарної намагніченості зміщується у бік збільшення намагніченості. Високотемпературна залежність магнітної сприйнятливості при збільшенні відштовхування також зміщується у бік більших значень. Зростання кулонівського відштовхування зменшує висоту основного максимуму температурної залежності теплоємності, а у випадку основного стану NAF перебудовує ще й низькотемпературний максимум.

Виявлено, що температурна крива теплоємності при відсутності зовнішнього магнітного поля крім основного максимуму може мати ще й два низькотемпературні максимуми. При асиметрії іонівських взаємодій $\Delta\tilde{I}$, що лежить далеко від точки співіснування станів FRI і NAF, є один низькотемпературний максимум, який виникає в результаті складної конкуренції між станами FRI, NAF і UPA: або основний стан FRI конкурує зі станами NAF і UPA, або основний стан NAF конкурує зі станами FRI і UPA. При асиметрії іонівських взаємодій $\Delta\tilde{I}$, що належить околу точки співіснування станів FRI і NAF, цей низькотемпературний максимум розщеплюється на два максимуми. Розташований при найнижчій температурі максимум відповідає конкуренції між станами FRI і NAF, а другий низькотемпературний максимум відповідає конкуренції стану UPA зі станами FRI і NAF.